

NATIONAL
INSTITUTE FOR
MATERIALS
SCIENCE

NIMS NOW

No. 10

2012 DECEMBER



材料研究を加速させるデータベース

MatNavi

材料研究を加速させるデータベース

MatNavi

物質や材料の特性が検索できるデータベース、

とひとことではいば、なんでもないもののように聞こえる。

しかし、MatNaviほどのデータベース群は世界でも稀だ。

その規模の大きさ、材料研究に特化したそのユニークさ。

一般にも利用可能で、無料な点も特筆すべきだろう。

データベース群は高分子、無機材料、金属材料、超伝導材料など、

11のデータベース、4つのアプリケーションシステム、

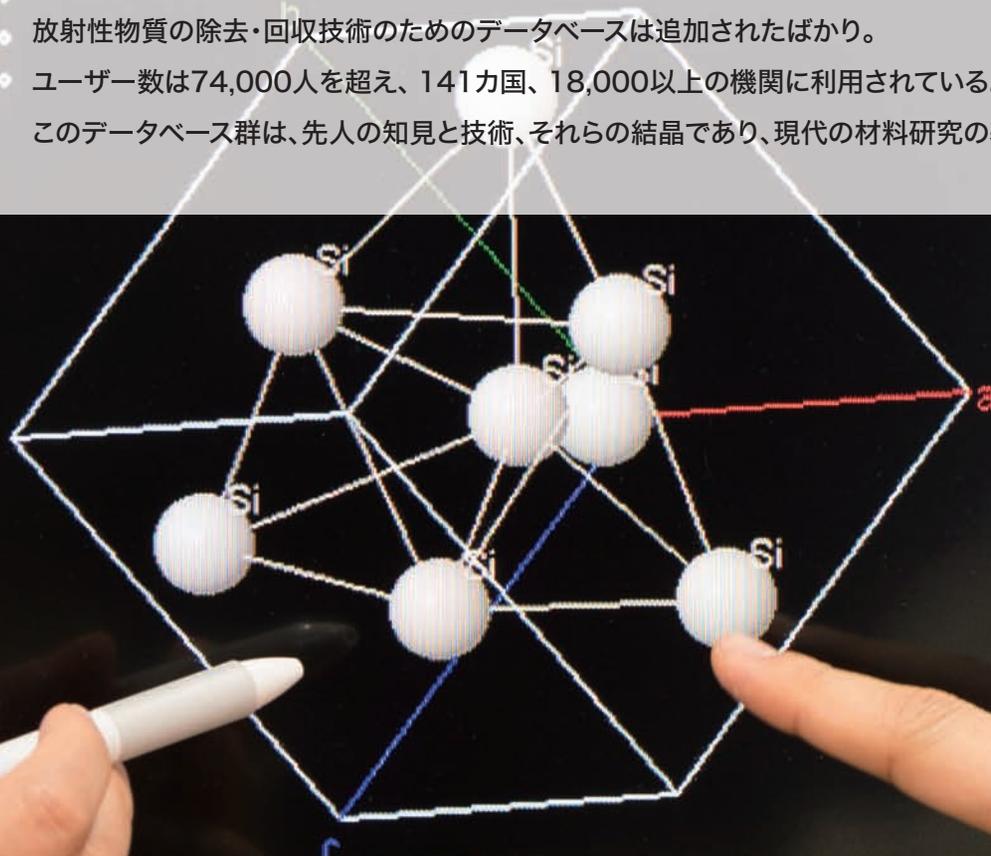
6種の構造材料データシートで構成される。

放射性物質の除去・回収技術のためのデータベースは追加されたばかり。

ユーザー数は74,000人を超え、141カ国、18,000以上の機関に利用されている。

このデータベース群は、先人の知見と技術、それらの結晶であり、現代の材料研究の基盤なのだ。

P 2ac 2ab
a=4.523Å
b=4.523Å
c=4.523Å
α=90.0°
β=90.0°
γ=90.0°



特別寄稿

Mat Navi 新機能材料発見のために

Maryland 大学
竹内一郎

最近のアメリカにおける材料研究の動向をみると、ひとつの傾向があることがわかります。それは、持続可能性に関連した研究、とりわけエネルギー問題への応用を意識した材料の改良・開発にフォーカスした研究が多く見られるという点です。また、計算科学に基づく材料設計や新たな組み合わせの予測についても多くの研究がなされており、これらの研究は、その予算規模も拡大傾向にあります。

私の研究グループでは、さまざまな機能性材料の組み合わせの研究をしています。そのなかに、米国エネルギー省と国防省からの予算で、薄膜ライブラリを用いておこなっている無機機能材料の新規特性の研究があります。最近の例を挙げると、レアアースを含まない新たな永久磁石を、次世代電気自動車やハイブリッド車、風力タービンのモーターに利用することを想定して研究しています。

こういった研究では、どの素材から組み合わせの候補とするのかを決めるためにも、過去の材料研究の総合的なデータベースが大変重要になってきます。しかし、ほとんどの分野において、そういった統合的なデータベースはありません。

そんななかで、MatNaviのAtomWork（無機材料データベース）は、今までに出版された膨大な文献を基にした、これまでにないデータベースです。関連する物理特性を見やすい表にリスト化することもできます。一般の人が利用できるこういった材料データベースは極めてまれです。

たとえば、私たちがレアアースフリーの永久磁石を作るプロジェクトをはじめたとき、これまでに研究者たちが試してきた材料や化合物について大量の文献があることはわかっていました。材料によってはよく知られた一般的なものもありましたが、もちろんそうでないものもあります。ですが、過去に試された材料をすべて知る人などいません。そうしたなかでMatNaviの膨大なデータは非常に有益です。今では、新しい材料を試みるときにはまずAtomWorkで調べてからにしています。



また、新規超伝導材料開発の研究においても、私たちはおなじMatNaviのSuperCon（超伝導材料データベース）を利用しています。こちらも、過去に研究された超伝導体に関する大量のデータが収録された非常に強力なデータベースです。扱うデータは非常に広範で、最大29,000件の登録データがリストアップされます。一件ずつ参照資料に基づいて詳細な特性が登録されていることを考えると、MatNaviチームによる莫大な労力が費やされていることがうかがい知れます。SuperConのもうひとつの特徴は、特性一覧表を作成し、ダウンロードできることです。この表を用いてデータマイニングをおこない、特性間にある隠れた相互関係を見出すことも可能になります。

このようなデータベースを、一件ずつ手入力して作りあげていくのは非常に時間のかかることです。そのため、マシンリーディングを使い、過去の文献から自動的にどれが重要な情報かを判断し、抽出できるか、が近年議論されています。こうした取り組みはまだ準備段階ですが、将来的にさまざまなデータベースの構築に必要となってくるでしょう。

計算科学の分野でも、構造情報の計算をおこない、新しい化合物を予測するためのデータマイニングのツールとして、ICSD（無機結晶構造データベース）などのデータベースを利用している研究グループが多数あります。MatNaviから取れるデータは、このような目的にも役立つのではないのでしょうか。

私たちのグループは、MatNaviの莫大なデータをどのように活用できるか、いまでも日々学んでいます。このようなデータベースが一般にも開かれていることを非常にありがたいと思います。医学、生物化学におけるゲノム情報が極めて重要な役割を果たしているのと同様、今後はMatNaviなどのデータベースが材料研究においてますます重要になることでしょう。

たけうち いちろう Ph.D. 米国ローレンス・バークレー国立研究所を経て現在メリーランド大学材料工科学教授。東京工業大学、東京理科大学、ドイツ・ルール大学、東京大学などで客員教授。

NIMS 物質・材料データベース MatNavi 使われてこそ価値あるデータベース

中核機能部門 材料情報ステーション
 ステーション長
 緒形俊夫

はじめに

NIMS物質・材料データベースMatNaviは、世界最大級のオンライン材料データベースです。MatNaviは高分子データベース、無機材料データベース、金属材料データベースなど11種類のデータベース、複合材料熱物性予測システムなど4種類のアプリケーションおよびNIMS構造材料データシートのオンライン版などで構成され、インターネット <http://mits.nims.go.jp/> で無料公開しています。

材料の種類も数もこの数十年で桁違いに増えた現代では、材料データベースは既存材料の適切な選択のみならず新しい材料の開発に不可欠です。今後も増加する物質や材料にも対応することがデータベースに期待されています。さらに、データベースのハードウェアを保守するだけでなく、継続的なデータのアップデートや、インターネットではサイバー攻撃などに対する対策も必須です。

MatNavi の経緯

2001年にNIMSが発足した際に、(独)科

学技術振興機構(JST)が開発した高機能物質データベースが移管されました。それとともに、NIMSの前身である旧金属材料技術研究所(NRIM)のデータベースを一元管理することになりました。そして2年後の2003年4月、これらのデータベースをMatNaviとしてインターネット公開をはじめたのです。その後、サーバーのOSやユーザー認証システムを統合するなどの改造をすすめるとともに、システムの維持管理費の低減を図りました。そして2010年7月にはサーバー機器およびシステムをある程度統合して、「新MatNavi」を公開しました。

MatNavi の使い方

MatNaviの各データベースはユーザー登録をすれば無料で閲覧できます。図1にMatNaviのトップページを示します。MatNaviはNIMSの材料情報ステーションが運用管理している各種データベースとその横断検索システム、アプリケーション、NIMSの研究グループから発信している材料情報および材料データベースを発信している国内外

の機関のWebサイトとのリンクなどで構成されています。現在、MatNaviで公開しているデータベースなどのリストを図2に示します。高分子データベース、無機材料データベースおよび金属材料データベースについては、この後に紹介しますが、他のデータベースと詳細については特集記事¹⁾を参考にしてください。

ユーザー登録は画面右上のユーザー画面にある新規ユーザー登録をクリックすると登録画面が表示され、各項目を入力して登録すると電子メールアドレスに登録したパスワードが直ちに自動で送信されてきます。一度ユーザー認証を受けるとすべてのデータベースにアクセスが可能です。

さらに、横断検索システムMatNavi Searchでは、MatNaviの各種データベースの中に、必要とするデータがどこに何件あるかを素早く調べることができます。

MatNavi のユーザーとアクセス数

図3に登録ユーザー数の推移を示します。毎月2千人を超えるユーザーが認証を受け



図2 MatNaviで公開しているデータベース

図1 MatNaviのトップページ

利用していることがわかります。2012年10月31日の時点で登録ユーザーは141ヶ国18,121機関、73,652人(国内53,487人、海外20,165人)に達し、2003年の公開から9年7ヶ月で12倍以上になりました。

また、図4にMatNavi全体での最新のアクセス件数の推移を示します。2010年7月の新システム公開後は平均して毎月120万件のアクセスがあり、それ以前の倍になっています。2012年10月には170万件を超えました。アクセスの多いのは無機材料データベース、高分子データベース、および金属材料データベースなどです。

MatNaviの活動と評価

MatNaviでは、“使われてこそ価値あるデータベース”をモットーにITやサーバー機器の進歩を取り入れながらデータの充実に努めています。

国内、海外のユーザーの約40%がGoogle, Yahoo, goo など汎用検索エンジンでMatNaviを見つけており、“材料データベース”で検索するとトップでヒットし、“Materials database”でも常にトップページに表示され、MatNaviは名実とともに世界最大級の材料データベースとして位置づけられ

ています。

2011年12月にはMITSデータベースシンポジウムを秋葉原で開催し、150名以上の参加者がありました。また、2012年4月には、日中韓を中心に第3回アジア材料データシンポジウムを沖縄の那覇で開催し、ベトナムやタイさらに欧米他からの参加者を含め100名以上の参加者がありました。このシンポジウムは今後も2年に1回、日中韓の持ち回りで開催されます。

MatNaviは、国内外で非常に有用なデータベースとして高く評価されるだけでなく、NIMSの外部評価においても、評価の高い成果の一つとして認知されています。これまでの運営と成果に対し、2012年4月にNIMSの理事長賞を受賞し、さらに10月には文部科学省から情報化促進部門 情報化促進貢献の文部科学大臣表彰を受けました。

今後の課題について

データベースは、データを更新し続けることで、更新されたデータが既知のデータとともに参照され活用されますが、更新されなければ使われなくなり消えてしまいます。高分子データベースは、以前は約2000件の文献を抽出しデータを採取していましたが、今は

予算の都合もあり、600件がやっとです。無機材料データベースAtomWorkも、2年前にデータを拡充しアクセス数も急増しましたが、10年前までのデータなのでユーザーからも拡充の強い要請があります。しかし、これも予算と契約の都合で更新が難しい状況です。さらに、電子構造計算データベースの充実も強く求められています。

また、MatNaviデータベース事業に従事する専任の職員が不在で、今後は充実されることが期待されています。高分子データの文献データの採取は、現役を引退した専門家が長年従事しており、データの信頼性を確保していますが、後進の育成が急務となっており、さらなる充実が必要な状況です。

これらの課題を解消するためにもMatNaviの利用拡大を図っています。その一つとして、データシートオンラインのクリープデータと疲労データを、グラント社のデータベースへとライセンス供与をおこないました、さらには国内企業からのデータベースの効果的利用なども検討しています。今後は、新元素戦略研究への寄与を実現し、データベースの一層の充実を図ろうとしています。

1) 緒形他、材料データベースが支える研究開発、金属、vol.81、No.12(2011)、p.1005-1078

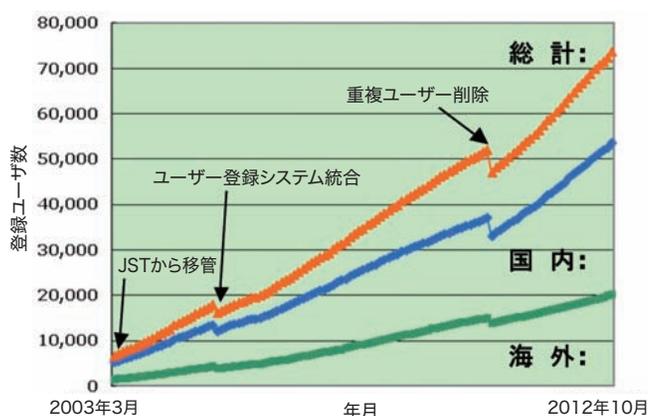


図3 MatNaviの登録ユーザー数の推移

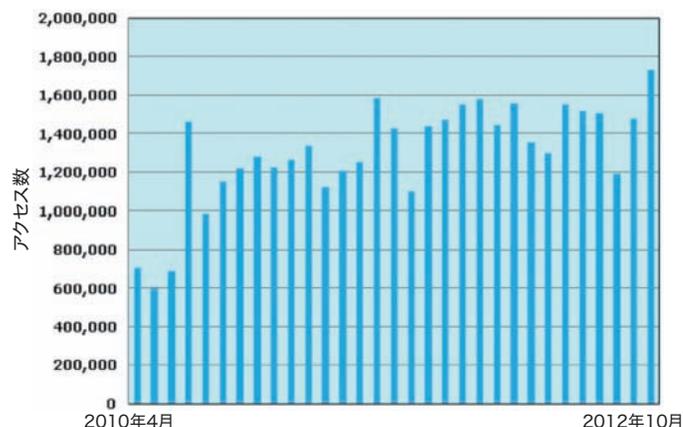


図4 アクセス数の推移

無機材料データベース：AtomWork 材料データから材料の本質を探索する

中核機能部門 材料情報ステーション
 徐 一斌

材料データベースにとって何が重要か

材料データベースは、材料の構造や特性などのデータを提供するだけではありません。ある材料が、なぜその特性を持っているのかをユーザーに理解してもらうことが肝心です。さらには、新規特性材料を設計するとき、そのための設計指針をユーザーに提供することも重要です。これらすべてが、材料データベースの目標です。

材料特性は、その構成と構造により決定されます。そのため、材料データベースでは材料の構造、構成、構成される材料の特性データを有機的にリンクし、関連性のある材料を適切にグループ化することが必要となります。NIMS無機材料データベース「AtomWork」は、こうした機能が実装されている世界でも稀有なデータベースです。

AtomWork データセット

AtomWorkの前身は、(独) 科学技術振興機構 (JST) が開発していた材料データベース「PaulingFile」です。これは1995年から2002年まで、JSTとスイスのMaterial

Phases Data System (MPDS) とが協力して開発していたもので、科学文献から無機材料の状態図、結晶構造、特性データを収集していました。2008年、JSTはこのPaulingFileのデータセットとデータ著作権をNIMSに譲渡しました。その後NIMSは、MPDSと協力し、データの補足と検証作業をおこないました。その際、粉末X線回折パターンと結晶構造の2D、3D画像を計算、作成し、これを組み合わせ、AtomWorkのデータセットとして完成させました。

現在のAtomWorkデータは、状態図(15,000件)、結晶構造(82,000件)、X線粉末回折(82,000件)、特性データ(55,000件)、およびフェーズインデックスデータから構成されています。X線粉末回折データは、結晶構造データからRIETAN-FP^{※1}というソフトを用いて計算したものです。各結晶構造に対して、a-, b-, c-軸と対角線方向の4つの二次元画像が作成されます。特性データは力学、熱と熱力学、光学、電子と電気など、9のカテゴリに分類された100種類の特性が対象となっています。

AtomWorkでは、異なる文献で報告されたデータは異なる材料のものとして扱いますが、フェーズインデックスデータによって、元素、化合物、物質の各レベルで関連性のある材料をグルーピングし、比較することが可能です。このフェーズインデックスは、化学システム、化学式、結晶構造で構成されています。化学システムは材料の構成元素を参照し、元素レベルで材料を識別します。化学式は化合物レベルで、化学式と結晶構造の組み合わせでは物質のレベルで材料を識別します。

具体的な検索と求められるデータ

AtomWorkの材料検索画面(図1)では、ユーザーが材料の構成元素、もしくは化学式に加え、結晶構造を指定することができます。この検索条件によって元素レベル、化合物レベル、物質レベルでの検索結果が表示されます。

たとえば、Al-Ti化学システムで検索した結果を見てみましょう(図2)。ここには12の物質が含まれています。Ti₃Alの化学式で検索した結果(図3)を見てみると、2個の物質が

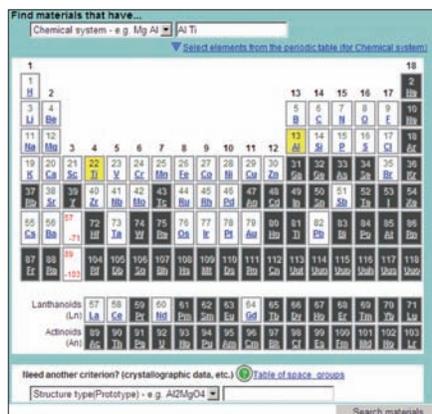


図1 材料検索画面

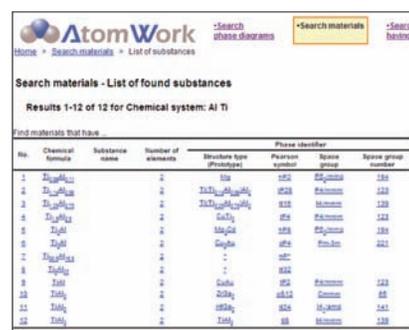


図2 化学システム“Al-Ti”での検索結果

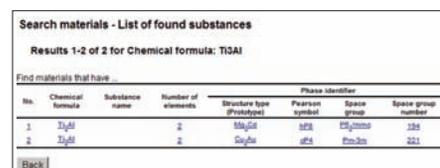


図3 化学式“Ti₃Al”での検索結果

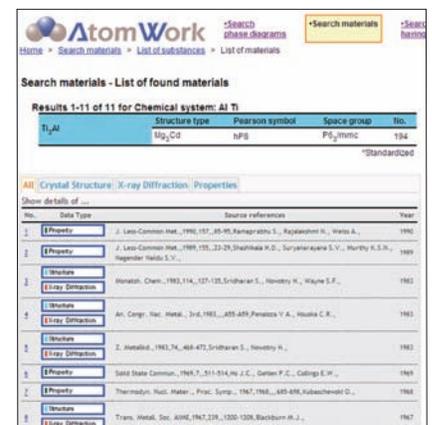


図4 化学式“Ti₃Al”+結晶構造“hP8”での検索結果

含まれていることがわかります。この化学式 Ti_3Al に結晶構造 hP8 を加えた検索結果 (図4) では、1 個の物質が特定されていることがわかります。さらに同じ画面では、特定された物質を含むすべての材料に関する文献のリストが表示されます。そのリストは結晶構造、X線回折、特性の3つのカテゴリにそれぞれ分類されており、カテゴリごとに表示させることもできます。そのリストからは文献の内容が表示されます (図5)。結晶格子や原子座標などのほかに、2Dと3Dの画像も表示されます。結晶構造のデータは多くの計算ソフトや結晶構造ビューワに直接インポートできる crystallographic information file (CIF) ※2 形式でダウンロードできます。

特性データも同様に、元素レベル、化合物レベル、物質レベル、材料レベルで検索、表示することができます。例として、「化学システム Al-Ti と体積弾性係数のデータが存在する」という条件で検索した結果 (図7) をみるとわかるように、こうした検索方法は化学式

や結晶構造の異なる材料間の特性比較や、化学式や結晶構造が材料の特性にどのような影響を与えるのかを調べるのに便利です。

状態図を検索する場合、「Al」と「Ti」を入力すれば Al-Ti 系の状態図の一覧が表示されます。リスト化された物質 (フェーズ) はそれぞれ物質の検索結果に紐付けされています。

AtomWork の応用

物質の状態図、結晶構造、特性データは材料の合成、材料特性の理解、新材料の設計に非常に重要な基礎データです。AtomWork の機能を有効に活用して、それぞれのデータを表示するだけでなく、グルーピングや比較などをおこなうことにより、材料の構成、構造要素の解析がおこなえ、さらには材料特性の予測にも役立てることができます。

さらに、AtomWork はほかの計算科学ソフトと連携し、新しいデータをつくることもできます。たとえば、結晶構造データを第一原理計算ソフトにインポートし、電子構造を算

出したり、単相材料の特性データを複合材料特性予測システム※3 にインポートし、複合材料の特性計算も可能です。このような手法で、実際に AtomWork のデータを利用した新しいデータベース「NIMS 界面熱伝達率データベース (ITC)」も MatNavi で公開しています※4。

※1 F. Izumi and K. Momma: Solid State Phenom. 130 (2007) 15.

※2 International Union of Crystallography: CIF, <http://www.iucr.org/resources/cif/>.

※3 NIMS 複合材料熱物性予測システム CompoTherm, http://composite.nims.go.jp/index_jp.html

※4 NIMS 界面熱伝達率データベース (ITC), <http://interface.nims.go.jp/>

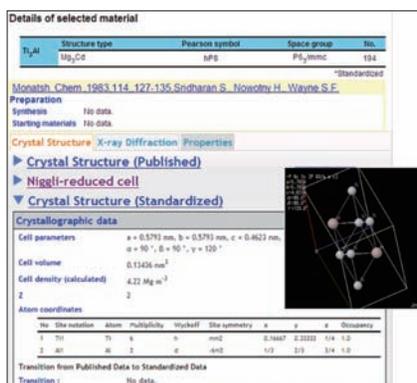


図5 結晶構造の表示画面

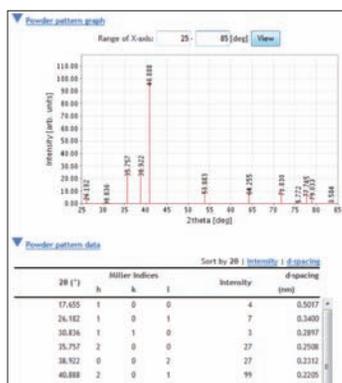


図6 X線粉末回折の表示画面

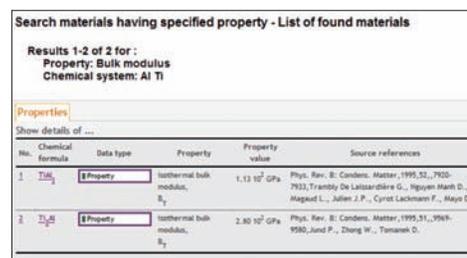


図7 化学システム「Al-Ti」と特性名「体積弾性係数」での検索結果

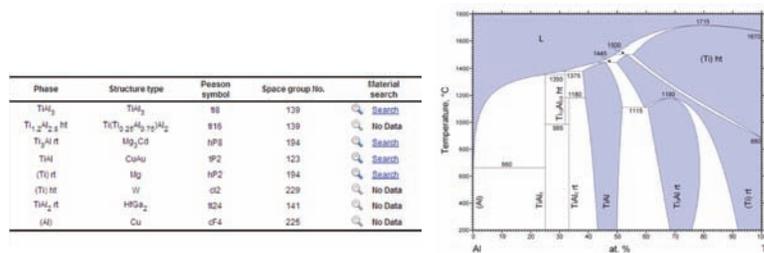


図8 状態図の一例

高分子データベース : PoLyInfo 開発からその活用まで

中核機能部門 材料情報ステーション
 桑島 功

中核機能部門 材料情報ステーション
 細谷 順子

中核機能部門 材料情報ステーション
 清水 精子

中核機能部門 材料情報ステーション
 間下 健太郎

はじめに

高分子データベース PoLyInfo (<http://polymer.nims.go.jp/>)は高分子を利用した材料設計に必要とされる情報を学術文献から収集してインターネットによって無料で提供しているデータベースです。ポリマー名称、化学構造、重合方法、成形方法、物性値、測定条件、原料モノマーなどの情報を収録しています。拡張機能として物性推算システム、自動命名システム、NMRデータベースがあります。

PoLyInfoの開発

PoLyInfoは1995年に(独)科学技術振興機構(JST)が高機能物質データベースの1つとして開発をはじめ、1998年にプロトタイプを公開しました。その後、2003年にNIMSに移管され、以来約10年にわたり、NIMS物質・材料データベースMatNavi (<http://mits.nims.go.jp/>)の1つとして、データおよび機能の拡張をすすめているものです。

データ源とデータ収集

PoLyInfoのデータ源はChemical Abstracts Service (CAS)に登録された高

分子情報を含む学術文献から化学構造が明確で各種物性の実測値を有する文献を採択しています。現在、年間約600文献からデータを収集しています。収集する内容は化学構造、材料の特徴、分子量、重合方法、成形方法、試料形状、結晶構造、物性値、測定条件、原料モノマーなどで、サンプルごとに約1500行ある独自のデータフォーマットに収集可能な情報を入力していきます。対象としている物性は熱的物性、電気的物性、物理化学的物性、機械的物性などを中心に約100種類です。

また、PoLyInfoでは文献から収集した情報をもとに高分子辞書と呼ぶ独自の高分子用化合物レジストリシステムを開発して運用しています。辞書は収集したサンプルデータの共通部分をまとめたもので、これによりポリマー名称、化学式、化学構造に基づく検索、同定を可能にしています。文献からのデータ収集と辞書データ作成を行う作業は企業の高分子研究者OBの方々によっておこない、それぞれ収集者とは別の編集者によってダブルチェックをおこなっています。データ収集、編集、辞書データ作成、システム運用など、PoLyInfoに係わる人員は外部委託を含め総

勢13名です。2012年11月現在、公開しているデータはポリマー:18,278種、ポリマーブレンド:1,537種、コンポジット:1,638種、サンプル:94,886、物性ポイント:241,899、モノマー:16,601、採択文献:13,721です。

検索方法

PoLyInfoには材料開発、製品開発、材料選択、トラブルの原因調査、授業・講演の資料、レポート・論文作成などを目的とするユーザーがありますが、このユーザー達が必要とする情報を素早く獲得するために様々な検索機能を用意しています。

ポリマー検索 (Polymer Search)には名称、分類、化学式、材料種別、物性種、物性値、文献などを必要に応じて入力または選択して検索する“Basic”があります。さらに詳細な条件を指定して検索をおこなう“Advanced”では、コポリマー、ポリマーブレンドの成分指定、添加剤・充填剤、平均分子量、試料形状、結晶化度、物性は最大3種類などを指定することができます。また、ポリマー構造検索 (Polymer Structure Search) には構成単位に含まれる原子団の種類と個数を指定する“by Elements”とモ

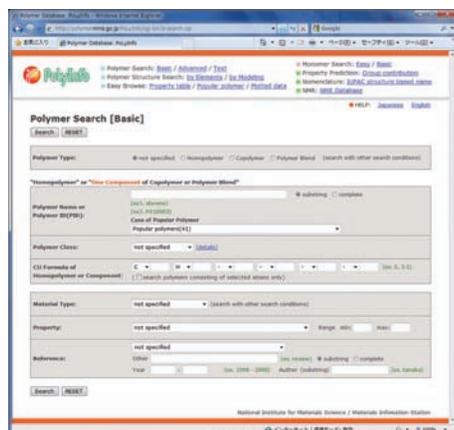


図1 ポリマー検索 (Polymer Search) “Basic”画面

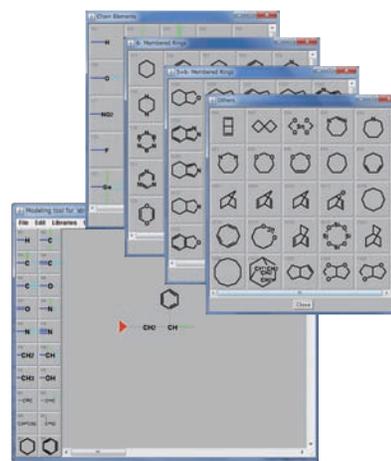


図2 ポリマー構造検索 (Polymer Structure Search) “by Modeling”画面

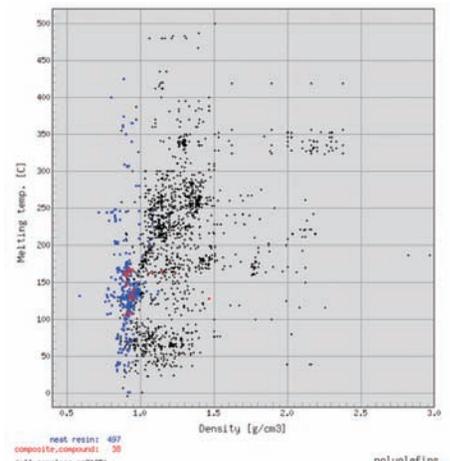


図3 簡易操作 (Easy Browse) “Plotted data”画面 (X軸: Density, Y軸: Melting temp., 分類: polyolefinsを指定)

デリングツールを用いて構成単位を作図し、並んでいる順序やその結合関係まで指定した検索をすることができる“by Modeling”があります。簡易操作 (Easy Browse)にはX軸とY軸に目的の物性種を選択してグラフを描画し、目的の物性値の範囲から検索する“Plotted data”などがあります。また、ポリマーの原料となるモノマーからの検索も可能で、モノマー名称、各種登録番号、分類、分子式、分子量を指定することができます。このヒットしたモノマーから重合するポリマー情報へ移動することができます。

拡張機能

物性推算システムは原子団寄与法を用いたガラス転移温度、熔融温度、溶解度パラメータ、表面張力、界面張力、誘電率、屈折率、密度、引張強度、破断強度について推算することができます。推算式はVan Krevelenの式、パラメータにはVan KrevelenのパラメータとPoLyInfoの収集したデータをもとに最適化をおこなったPoLyInfoパラメータを利用しています。この推算した値はPoLyInfoで収集した実測値と比較することができます。また、自動命名シ

ステムはモデリングツールを用いて構成単位を作図することで、IUPAC準拠の構造基礎名を自動的に作成することができます。NMRデータベースではサンプル154種について、 ^1H 、 ^{13}C のNMRスペクトルデータと帰属データを提供しています。PoLyInfoのポリマー情報からリンクもしていますが、ポリマー条件、ポリマー構造、化学シフトから検索するNMR専用の検索機能を用意しています。

PoLyInfoの活用例

ユーザーによって利用方法はさまざまですが、最も多い利用方法は標準参照データとしての利用で、一般的なポリマーの確認や技術資料などに不明なポリマーがあったときの調査、材料設計のための基礎データとして、また、自作したポリマーとの比較などの利用があります。さらに、新規ポリマー開発の際に目的の分子構造のポリマーがどのような性質を有するかをPoLyInfoで調査して候補を絞り、合成実験の回数を減らしているユーザーもいます。研究企画では新たな製品を検討する際に類似した物質等の提案に利用されています。この他にも、合成したポリマーのスペクトルの同定にNMR情報を活用するユーザー

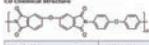
やシミュレーションの基礎データとしてPoLyInfoからデータを抽出して利用しているユーザーもいます。従来は書籍や論文などを入手して、確認していた情報をオンラインデータベースであるPoLyInfoで即座に検索して利用しています。

今後の課題について

PoLyInfoは開発当初、ホモポリマーのみのデータベースでしたが、近年の高分子辞書の拡張により、扱えるポリマーは大きく広がっています。しかし、多分岐のポリマーに対しては不十分で、これからも改良をすすめます。ユーザーについては当初想定していた高分子の専門家だけでなく、高分子を利用する様々な業種、職種の方から利用されています。ユーザーフレンドリーな検索、表示への改良もおこなわなくてはなりません。また、一機関ですべての情報を保有することは難しく、ユーザーにとって有用な外部システムとの連携もすすめ、幅広い情報を提供したいと思います。材料データベースを構築・公開する業務は一過性ではなく、長期間連続的におこなわなければなりません。組織的、予算的な面でのモデルづくりが最も大切な課題です。

Sample Information

Chemical Structure



Sample ID:	15107-0-1
File:	PE1002
Name:	poly(1,4-terephthalate)-alt-(1,4-phenylenevinylene)-alt-(1,4-phenylenevinylene)
Polymer Types:	Aliphatic/aromatic (Alkane, Polyamide, Thioamide, Polyether/ether/ether/ether)
UP Number:	CDW100206
Formula weight(MW):	194.12
Characteristics of material:	None
Material Type:	None
Research: OPA / A-F synthesis	
Type: polycondensation	
RPK: solution polymer	
Research: A-C condensation	
Polymerization Information:	
Polymerization system: solution acid precursor (solvent cast film)	
Polymer reaction condition: 100°C, 3h (100°C, 1.5h)	
Reference: Vol. 17	
Processing Information:	
As received	
Shape of Test Piece: Film	
Remarks: 1 = 0.30mm	
Reference:	
Li, Tsunoyuki, Wang, Tsunoyuki, Hwang, Hwang, Hwang, Journal of Applied Polymer Science, 63, 1, 1997 (1997)	
Property:	
Infrared:	
• Density: 1.376 (g/cm ³)	
• Refractive index: 1.5787 (1.5787)	
• Method: fitting method	
• Condition: 10 [C], 45000-carbon tetrachloride	
• Glass transition temp.:	
• Glass transition temp. (20 [C])	
• Method: DSC	
• Condition: Heating rate: 10C/min	
• Use probability and diffusion:	
• Use probability coefficient (P): 1.000 (1) [use:GPR]([use:"*"]*)	
• Condition: 10 [C], present-temperature, present: stable	
• Use probability and diffusion:	
• Use probability coefficient (P): 1.000 (1) [use:GPR]([use:"*"]*)	
• Condition: 10 [C], present-temperature, present: stable	
• Use probability and diffusion:	
• Use probability coefficient (P): 1.000 (1) [use:GPR]([use:"*"]*)	
• Condition: 10 [C], present-temperature, present: stable	

Other values in this database

図4 サンプル情報“Sample Information”画面

Property	Unit	Value (V.M.)	Condition(*) (V.M.)	Value (PolyInfo)	Condition(*) (PolyInfo)	ref. calc.	Observed Average	Observed Min/Max	Units
T_g	[C]	77		55			76	76	102
T_m	[C]	294		255			252	254	533
ρ	[g/cm ³]	20.01	vs 150.7 [cm/min]	20.02	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	21.37	21.8	6
n_D	[1.5787]	0.489		ref. calc.			0.5	0.5	1
n_D	[1.5787]	0.213		ref. calc.			0.5	0.5	1
n_D	[1.5787]	18.82		ref. calc.			18.5	18.5	1
n_D	[1.5787]	3.19		ref. calc.			0.6	0.6	1
α_D	[deg/min]	49.6	vs 150.7 [cm/min]	63.3	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	39.7	41.7	62
α_D	[deg/min]	3.262		ref. calc.					
α_D	[deg/min]	27.32		ref. calc.					
α_D	[deg/min]	3.273	vs 150.7 [cm/min]	3.339	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	3.318	3.341	60
α_D	[deg/min]	3.507		3.527					
α_D	[deg/min]	1.242	vs 150.7 [cm/min]	1.252	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	1.212	1.196	121
α_D	[deg/min]	1.248	vs 150.7 [cm/min]	1.257	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	1.259		1.266					
α_D	[deg/min]	1.32	vs 0.3 [10-12]	1.62	vs 0.2 [10-12]	ref. calc.	1.38	1.36	165
α_D	[deg/min]	1.4	vs 0.3 [10-12]	1.63	vs 0.2 [10-12]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	1.38	vs 0.3 [10-12]	1.5	vs 0.2 [10-12]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	1.38	vs 0.3 [10-12]	1.5	vs 0.2 [10-12]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	1.32	vs 150.7 [cm/min]	1.27	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	1.430	1.400	3
α_D	[deg/min]	1.32	vs 150.7 [cm/min]	1.27	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	0.781	vs 150.7 [cm/min]	0.781	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	0.710	0.710	2
α_D	[deg/min]	0.781	vs 150.7 [cm/min]	0.781	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.			
α_D	[deg/min]	0.24	vs 150.7 [cm/min]	0.24	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.	0.173	0.174	30
α_D	[deg/min]	0.24	vs 150.7 [cm/min]	0.24	vs 138.0 [cm/min]	ref. calc.			

図5 PET, poly (ethylene terephthalate)の原子団寄与法による物性推算結果画面

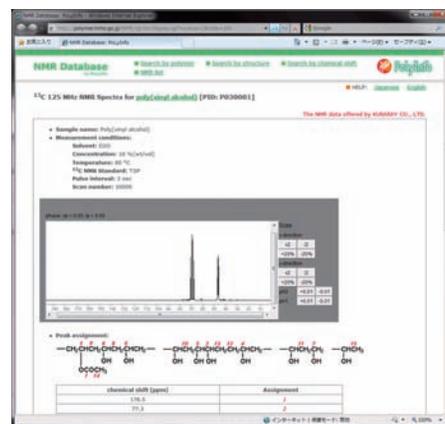


図6 PVA, poly (vinyl alcohol)の ^{13}C 125 MHzにおけるNMRスペクトル画面

くわじま さいお 2000年工学院大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了、2002年からPoLyInfoおよびMatNavi開発担当、材料情報ステーションNIMS研究員。 / ほそや じゅんこ 2000年筑波大学大学院環境科学研究科環境科学専攻修士課程修了、株式会社コスモニックツーフン入社以来、MatNaviシステム開発および運用管理担当。 / しみず よしこ 1977年玉川大学農学部農芸化学科卒業、1997年からJST、NIMSでPoLyInfoデータ管理担当、材料情報ステーション 研究業務員。 / ました けんたろう 理学博士。1967年東京大学理学部化学科卒業、住友化学(株)を経て1999年からJST、NIMSでPoLyInfoデータ編集担当。

金属材料データベース：KinzoKu 強度からクリーブ破断データまで、さらに進化を求めて

中核機能部門 材料データベースステーション
 山崎政義

中核機能部門 材料データベースステーション
 細谷順子

500 材種、3,500 ヒートの 金属材料データベース

金属材料データベース (KinzoKu) はそれぞれ開発者、開発時期が異なるさまざまなデータベースを、2010年にひとつに再構築したものです。そのデータベース群は、圧力容器材料データベース、基盤原子力材料データベース、および構造材料データシートオンライン数値データベースに収録されていた引張特性、クリーブ特性、クリーブ破断特性、疲労特性になります。さらには金属の基本的な特性である密度、弾性係数、ポアソン比、硬さおよび靱性データも収録されています。鉄鋼材料の強度データが多くなっていますが、アルミニウム合金、チタンおよびチタン合金も含まれており、500材種、3,500ヒート（製造プロセスの違い）の約82,700件の各種データが収録されています。

また、NIMSの構造材料データシートの

データはすべて未使用の新材のものですが、このKinzoKuには圧力容器などの実機で使用されたCr鋼の劣化材の靱性やクリーブ破断データなども含まれています。

さらに進化する KinzoKu データベース

KinzoKu は図1に示すように規格番号 (JIS, ASTM)、材料名 (炭素鋼、チタンなど)、素材形状 (Plate, Barなど)、材料履歴 (新材、回復材、劣化材)、化学成分範囲および各種特性を画面上で選択して検索できます。

図2は低合金鋼のポアソン比を検索した例です。3つの数値が表示されていますが、詳細画面に移るとそれぞれの値を示す材料の熱処理条件などがわかります。図3は低合金鋼の劣化材のクリーブ破断特性で検索した結果です。これらのデータのクリーブ破断曲

線をヒート別または複数ヒートを合わせて描くことができます。

図4にギガサイクル疲労データで検索した結果のグラフを示します。

クリーブや疲労など材料の各種特性は微量化学成分、製造プロセスおよび熱処理条件などの影響を受けて同じ規格材であっても同じ強度特性とはならずばらつきが生じます。そのためKinzoKuでは詳細情報画面で特性値とともに化学成分や熱処理条件を表示しています。

しかしながら、この金属材料データベース KinzoKuのシステムは未だ開発段階にあると考えており、これからさらに材料および特性値の種類を拡張していく予定です。



図1 KinzoKuの検索画面

特性情報	
規格番号	JIS G 4502
規格記号	SC45A02
材料名	中炭素鋼
化学成分 (ppm)	C: 0.45, Mn: 0.50, P: 0.015, S: 0.010
ポアソン比	0.2881, 0.2877, 0.2879

図2 低合金鋼のポアソン比検索結果の例

表番号	規格番号	規格記号	材料形状	材質	ポアソン比	材料履歴	化学成分	特性
1	JIS G 4502	SC45A02	棒状	中炭素鋼	0.2881	新材	C: 0.45, Mn: 0.50, P: 0.015, S: 0.010	引張特性
2	JIS G 4502	SC45A02	棒状	中炭素鋼	0.2877	回復材	C: 0.45, Mn: 0.50, P: 0.015, S: 0.010	引張特性
3	JIS G 4502	SC45A02	棒状	中炭素鋼	0.2879	劣化材	C: 0.45, Mn: 0.50, P: 0.015, S: 0.010	引張特性

図3 低合金鋼の劣化材のクリーブ破断特性の検索結果の例

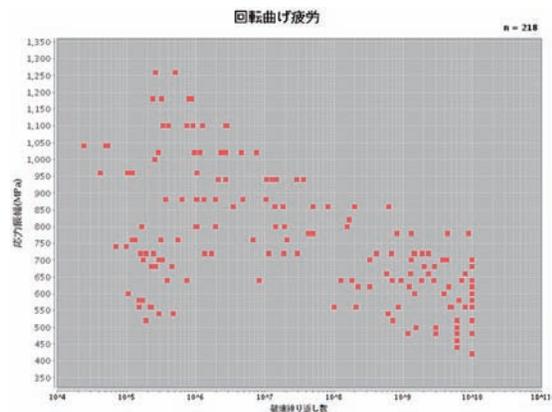


図4 ギガサイクル疲労データ

やまざき まさよし 1972芝浦工業大学機械工学科卒。金属材料技術研究所クリーブ試験部、力学機構研究部、NIMSデータベースステーションを経て現在NIMS特別研究員。/ ほそや じゅんこ プロフィールはP.9を参照。

ユーザーの立場から： PoLyInfo がつなぐ高分子研究の伝統と材料開発の未来

先端的共通技術部門 高分子材料ユニット
分離機能材料グループ
佐光貞樹

これまでの高分子研究

高分子は、プラスチックやゴムのような汎用素材から、光通信や電子デバイス・医療応用にいたるまで、さまざまな用途に広く用いられており、社会を支える重要な材料群の一つになっています。NIMSでも、環境・エネルギーの課題解決や情報通信分野への貢献を目指して、高分子材料の先端研究を精力的におこなっています (NIMS NOW 2012年9月号参照)。

高分子が発見されたのは凡そ100年も前であり、ドイツ人科学者のシュタウディンガーは、1953年に高分子科学ではじめてノーベル賞を受賞しています。今日では、さまざまな分子構造を持った高分子が合成されるとともに、材料物性が幅広く測定・評価されています。我が国は、高分子産業が最も盛んな国の一つですが、学術界もそれに劣らず、多くの優れた研究成果を論文という形で世に広く送り出してきました。

一方、研究の広がりとともに発表論文数

は膨大になり、公開論文から必要とする物性データを整理することは年々難しくなっています。これは長年高分子研究に携わっている専門家ですら容易なことではなく、高分子の研究をはじめようとする学生や異分野の研究者、企業で働くエンジニアにとっては大きなネックになるでしょう。

研究開発を支えるデータベース

このような困難を乗り越えるツールとして、高分子データベースであるPoLyInfoが力を発揮します。PoLyInfoは、これまでに全世界で公開されてきた論文情報を網羅的に収集し、体系的に整理することで構築されました。既に、20,000種を超える高分子材料群に対して、熱的物性・力学的物性・電気的物性・物理化学的物性など100種類にもおよぶ物性項目をカバーしています。広範な文献データがデジタル情報として収録されており、パソコンによる情報検索機能を活用することで、知りたい情報を知りたいときにすぐ見つける

ことができます。

私自身も、研究を実施するにあたって、弾性率・強度などの力学特性や、融点・ガラス転移温度・融解エンタルピーといった熱物性、溶液物性など、多岐にわたるデータを日頃から活用しています (図)。高分子に関するこのような膨大な物性データを誰でも簡単に利用できることはPoLyInfoの最大の利点です。これまでは高分子の専門家に限られていた情報が、金属や無機材料といった材料研究者はもとより、化学・生物・電子・機械といった異分野の研究者や企業エンジニアまで広く世の中で活用されるようになることで、分野間の融合を促進し、飛躍的な物性向上を可能にする複合材料の創製や新しい応用分野を生み出していくことでしょう。PoLyInfoの更なる発展を、高分子研究に携わる一研究者として心より期待しています。

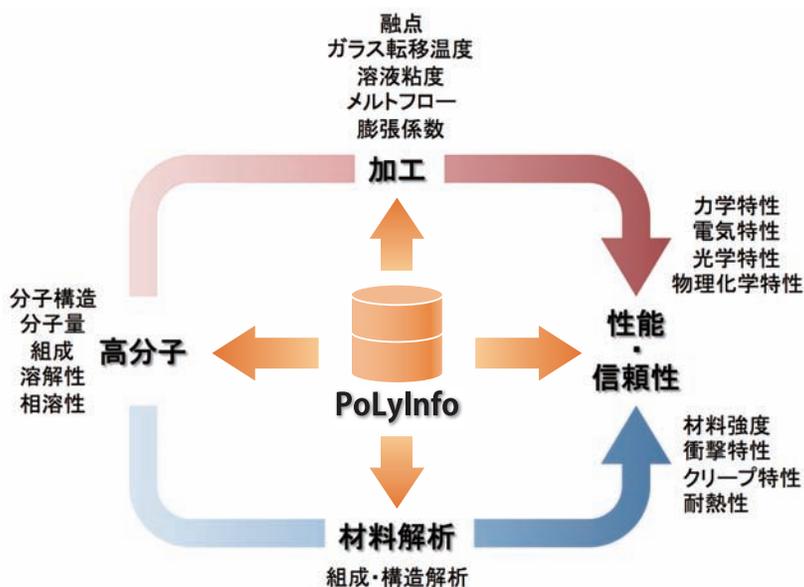


図 高分子材料の研究・産業の発展に対してPoLyInfoは多面的に貢献する

さみつ さだき 博士(工学)。2006年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了。京都大学理学研究科研究員を経て、2009年より現職。

1 つくばサイエンスコロボ 2012 に出展

11月17日(土)と18日(日)の2日間、NIMSは「つくばサイエンスコロボ2012」(主催:つくば市・つくば市教育委員会・筑波研究学園都市交流協議会「つくば3Eフォーラム」委員会、於:つくばカピオ・大清水公園(つくば市))に出展しました。このイベントは、「つくば科学フェスティバル」「つくば環境フェスティバル」など、3つのイベントが合同開催されたもの。これまでNIMSは、つくば科学フェスティバルに毎年出展しています。

今回NIMSのブースは、「いろんな材料で遊びながら学んでみよう!」がテーマ。新たな試み

として、つくば市教育委員会がすすめる学校・地域連携の科学教育推進事業「つくば市立桜中学校科学部とのコラボレーション」での出展となりました。

真ちゅうで作るオリジナル「キーホルダー作り」、金属の色や重さや物理的な性質のヒントから10種類の金属材料の名前を当てる「材料の名前当てクイズ」などを、予め中学校生徒にレクチャー。当日は、10人前後の中学生が来場者への案内や指導、実験教室の講師を務めました。生徒たちが自身の驚きをもって伝える内容は、来場者に非常に好評でした。

NIMSのブースは2日間でのべ500人以上の来訪者を迎える盛況となりました。



中学生とともに超伝導の説明を行うNIMSブースの様子

2 環境・エネルギー材料熱物性シンポジウムを開催

11月20日(火)、東京工業大学蔵前会館において、環境・エネルギー材料熱物性シンポジウム(主催:ハイブリッド材料ユニット、東京工業大学、TIA-nano、共催:NIMS材料情報ステーション、GREEN)が開催されました。このシンポジウムは、バルク材や、シート、薄膜、界面などを対象とした、マクロからミクロスケールまでの熱測定およびシミュレーション手法と、高熱伝導複合材料、熱電材料や断熱材料などの先端エネルギー材料の熱物性に関して最新研究動向を紹介し、産学連携の促進及び若手研究者の研究意欲向上を目的としたものです。名古屋産業科学研究所の八田一

郎上席研究員をはじめ、産業技術総合研究所、東京工業大学、NIMSの研究者による8件の招待講演と、東京大学、東京工業大学、NIMSの若手研究者による9件の研究発表、さらに企業研究者による4件の研究発表をもとに、活発な議論がおこなわれました。約140名の出席者のうち、企業からの参加者が75%を占め、特に、自動車、材料、機械、電気製品、計測機器メーカー

から多数の参加者があり、産業界における熱伝導の評価手法や基礎熱物性研究に対する高い関心とニーズが伺えました。

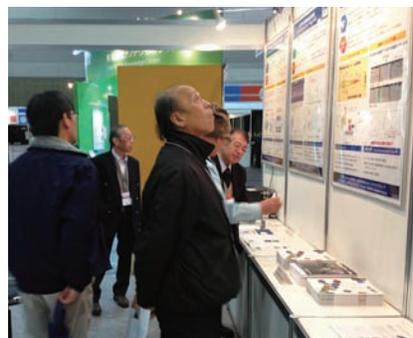


会場風景

3 第二回ものづくり基盤技術産業展に出展

11月28日(水)から30日(金)の3日間、NIMSはポートメッセ名古屋において開催された「第二回ものづくり基盤技術産業展」(主催:名古屋国際見本市委員会)に出展しました。ものづくり基盤技術産業展は、204の企業・団体が出展し、名古屋市、愛知県、名古屋商工会議所などから構成され、新素材をベースとした新たな加工技術・要素技術をもつくり産業が集積する名古屋で発信することを目的としています。

NIMSブースでは、グラフェンを用いたスーパーキャパシタや、溶射技術の1つウォームスプレー、ジスプロシウムを使用しない磁石技術などについて、ポスターや実物による展示をおこないました。3日間でNIMSブースを訪れた人の数は延べで200組を超えました。来場者の多くは企業関係者で、詳細にわたる技術面での質問が寄せられるなど感心の高さが伺えました。



NIMSブースの様子